



上海源叶生物科技有限公司
Shanghai yuanye Bio-Technology Co., Ltd
电话: 021-61312973 传真: 021-55068248
网址: www.shyuanye.com
邮箱: shyysw@sina.com

产品名称: **MMP13-IN-3**
CAS 号: **1222173-37-6**
产品货号: **S89349**

生物活性:					
Description	BI-4394 (MMP13-IN-3) 是一种化学探针, 是一种有效的, 具有口服活性的选择性 MMP-13 抑制剂, IC50 为 1 nM, 比作用于其他 MMP 的选择性高 1000 倍多。BI-4394 有潜力用于骨关节炎的研究。				
IC50 & Target[1]	MMP-13 1 nM (IC50)	MMP-14 8.3 μM (IC50)	MMP-9 8.9 μM (IC50)	MMP-10 16 μM (IC50)	MMP-2 18 μM (IC50)
In Vitro	BI-4394 (化合物 15) (11 nM) 可以降解全长 MMP-13 胶原蛋白, 并且能够抑制牛鼻软骨的降解, IC50 为 31 nM。BI-4394 抑制 MMP-2、MMP-9、MMP-10 和 MMP-14, IC50 分别为 18、8.9、16 和 8.3 μM[1]。				
In Vivo	当以 10 mg/kg 或 iv 1 mg/kg 口服给药时, BI-4394 (化合物 15) 达到微摩尔血浆水平 (AUC=1109±64 nM h/mL), 表现出适度的清除率 (CL=34 mL/min/kg), 并显示出可接受的生物利用度 (39%)。Vss 非常低, 为 0.26 mL/mi/kg 大鼠药代动力学曲线。BI-4394 具有较短的终末消除半衰期 (大鼠 (1 mg/kg, 静脉注射) 和大鼠 (10 mg/kg, 口服) 分别为 t1/2=0.47 小时)[1]。				
	Animal Model:		Srapgue Dally Rats[1]		
	Dosage:		10 mg/kg (oral gavage); 1 mg/kg (i.v.)		
	Administration:		Dosed orally (10 mg/kg); i.v. (1 mg/kg)(Pharmacokinetic Analysis)		
	Result:		T1/2=0.47 h for rat (1 mg/kg, i.v.) and rat (10 mg/kg, orally) , respectively.		
Solvent&Solubility	细胞实验: DMSO 中的溶解度 : 100 mg/mL (223.98 mM; 超声助溶 (<60°C); 吸湿的 DMSO 对产品的溶解度有显著影响, 请使用新开封的 DMSO)				
	Preparing Stock Solutions	Solvent / Mass Concentration	1 mg	5 mg	10 mg
		1 mM	2.2398 mL	11.1992 mL	22.3984 mL
		5 mM	0.4480 mL	2.2398 mL	4.4797 mL
		10 mM	0.2240 mL	1.1199 mL	2.2398 mL
*请根据产品在不同溶剂中的溶解度选择合适的溶剂配制储备液; 一旦配成溶液, 请分装保存, 避免反复冻融造成的产品失效。 储备液的保存方式和期限: -80°C, 6 months; -20°C, 1 month。-80°C 储存时, 请在 6 个月内使用, -20°C 储存时, 请在 1 个月内使用。					
参考文献	[1]. Taylor SJ, et al. Fragment-based discovery of indole inhibitors of matrix metalloproteinase-13. J Med Chem. 2011 Dec 8;54(23):8174-87. [2]. Ruminski PG, et al. Discovery of N-(4-Fluoro-3-methoxybenzyl)-6-(2-(((2S,5R)-5-(hydroxymethyl)-1,4-dioxan-2-yl)methyl)-2H-tetrazol-5-yl)-2-methylpyrimidine-4-carboxamide. A Highly Selective and Orally Bioavailable Matrix Metalloproteinase-13 Inhibitor for the Potential Treatment of Osteoarthritis. J Med Chem. 2016 Jan 14;59(1):313-27.				
完整储备液配制表:					
请根据产品在不同溶剂中的溶解度选择合适的溶剂配制储备液; 一旦配成溶液, 请分装保存, 避免反复冻融造成的产品失效。					
储备液的保存方式和期限: -80° C, 6 months; -20° C, 1 month。-80° C 储存时, 请在 6 个月内使用, -20° C 储存时, 请在					



上海源叶生物科技有限公司
Shanghai yuanye Bio-Technology Co., Ltd
电话: 021-61312973 传真: 021-55068248
网址: www.shyuanye.com
邮箱: shyyssw@sina.com

1 个月内使用。

可选溶剂	质量 溶剂体积 浓度	1 mg	5 mg	10 mg	25 mg
	浓度				
DMSO	1 mM	2.2398 mL	11.1992 mL	22.3984 mL	55.9961 mL
	5 mM	0.4480 mL	2.2398 mL	4.4797 mL	11.1992 mL
	10 mM	0.2240 mL	1.1199 mL	2.2398 mL	5.5996 mL
	15 mM	0.1493 mL	0.7466 mL	1.4932 mL	3.7331 mL
	20 mM	0.1120 mL	0.5600 mL	1.1199 mL	2.7998 mL
	25 mM	0.0896 mL	0.4480 mL	0.8959 mL	2.2398 mL
	30 mM	0.0747 mL	0.3733 mL	0.7466 mL	1.8665 mL
	40 mM	0.0560 mL	0.2800 mL	0.5600 mL	1.3999 mL
	50 mM	0.0448 mL	0.2240 mL	0.4480 mL	1.1199 mL
	60 mM	0.0373 mL	0.1867 mL	0.3733 mL	0.9333 mL
	80 mM	0.0280 mL	0.1400 mL	0.2800 mL	0.7000 mL
	100 mM	0.0224 mL	0.1120 mL	0.2240 mL	0.5600 mL

源叶